

Prom. Nr. 3663

**I. Verzerrungen von Absorptionsbanden
in Mikrowellenspektrographen
mit Stark-Modulation**

II. Mikrowellenspektrum von Azulen

Von der
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN
HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung
der Würde eines Doktors der technischen Wissenschaften
genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von
HANS-JAKOB TOBLER
dipl. Ing.-Chem. ETH
von Lutzenberg (Kt. Appenzell A.-Rh.)

Referent: Herr Prof. Dr. Hs. H. Günthard
Korreferent: Herr Prof. H. Primas

Juris-Verlag Zürich
1965

ZUSAMMENFASSUNG

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde eine Theorie über den Einfluss der Inhomogenität des Stark-Feldes auf die Bandenform von Starkkomponenten in Mikrowellenspektren entwickelt. Es wurde gezeigt, dass ein Standard-X-Band-Wellenleiter (0,9" X 0,4") beträchtliche Verschiebungen und Verzerrungen der Starkkomponenten produziert, während ein auf das Doppelte verbreiteter X-Band-Wellenleiter (1,8" X 0,4") für praktische Zwecke einem Parallelplattenspektrographen gleichgesetzt werden darf.

Im zweiten Teil wurde das Mikrowellenspektrum des Azulens mit einem phasenstabilisierten Stark-Spektrographen untersucht. Es konnten alle zu erwartenden starken Rotationsübergänge zwischen 7,9 und 12,6 kHz für den vibratorischen Grundzustand identifiziert werden. Ein Vibrationssatellit konnte zugeordnet werden.

Zur Auswertung der Resultate wurde ein ALGOL-Programm für einen digitalen Rechenautomaten aufgestellt, mit welchem die Uebergangsfrequenzen starrer quantenmechanischer Molekularkreisel aus den Rotationskonstanten berechnet werden können. Dasselbe Programm berechnet auch die Rotationskonstanten aus den gemessenen Frequenzen.

Mit den ermittelten Hauptträgheitsmomenten des vibratorischen Grundzustandes und eines angeregten Zustandes wurde die ebene Struktur und die Symmetrie C_{2v} der Azulenmolekel bewiesen.

Das Dipolmoment des Azulens wurde aus der Stark-Aufspaltung mehrerer Rotationsübergänge zu $0,808 \pm 0,007$ Debye ermittelt.

An den Q-Uebergängen bis $J = 40$ wurden die Zentrifugalverzerrungseffekte untersucht und in einer einparameterigen Darstellung beschrieben.